

Секція: **ФІЗИКА**

Керівники: **проф. Л.Дідух, доц. Л.Скоренький**

Секретар: **О. Маньовська**

УДК 538.1; 539.2

Л. Дідух, О. Крамар, Ю. Довгоп'ятий

(Тернопільський національний технічний університет ім. І.Пулюя)

НОВИЙ ВАРІАНТ УЗАГАЛЬНЕНОГО НАБЛИЖЕННЯ ХАРТРИ-ФОКА. II. ГУСТИНА ЕНЕРГЕТИЧНИХ СТАНІВ В МОДЕЛІ ХАББАРДА І ПОЛЯРНІЙ МОДЕЛІ

В роботі [1] був запропонований новий варіант узагальненого наближення Хартрі-Фока, який розширює область застосовності робіт [2, 3] при розгляді електричних і магнітних властивостей матеріалів з вузькими зонами провідності (оксиди, сульфід, селеніди перехідних металів). Внаслідок більш коректного, ніж це робилося раніше, врахування переходів „вузол” \leftrightarrow „хаббардівські зони”, отримано, зокрема, що вони зумовлюють як зсуви атомних енергетичних рівнів, так і їх розмиття. Наслідком цього є суттєва трансформація зонної електронної густини станів. Дослідження електронної густини станів в моделі Хаббарда [4] та модифікованій формі полярної моделі [5] є метою пропонованої роботи. За допомогою одноелектронної функції Гріна [1] приходимо до густини станів за умови слабкої металічності для парамагнітного стану:

$$\rho_1(E) = \frac{2-n}{2} \sum_{\vec{k}} \delta(E - E_1(\vec{k})),$$

(нижня підзона)

$$\rho_2(E) = \frac{n}{2} \sum_{\vec{k}} \delta(E - E_2(\vec{k}))$$

(верхня підзона); тут n – концентрація електронів, $E_1(\vec{k})$ і $E_2(\vec{k})$ – квазічастинкові енергетичні спектри, наведені в роботі [1]. Важливою особливістю отриманих виразів є те, що вони температурно-залежні та описують перехід діелектрик-метал. В роботі детально обговорюються графічні залежності густини станів при різних значеннях енергетичних параметрів моделі, які відображають отримані особливості.

Література.

1. Дідух Л. Енергетичний спектр електронів у вузьких енергетичних зонах: нове наближення середнього поля. I. Двополюсний спектр в моделі Хаббарда / Л.Дідух // Вісник ТДТУ.- 2009.- Т. 14, №1.- С. 180-189.
2. Didukh L. Energy spectrum of electrons in the Hubbard model: a new mean-field approximation / L. Didukh // Phys. Stat. Sol. (b). – 1998. – Vol. 206. – P. R5–R6.
3. Didukh L. A modified form of the polar model of crystals / L. Didukh // Condens. Matter Phys. – 1998. – Vol. 1. – № 1 (13). – P. 125–144.
4. Hubbard J. Electron correlations in narrow energy bands. / J. Hubbard // Proc. Roy. Soc. – 1963. – V. A276. – № 1369. – P. 238-257.
5. Дідух Л.Д. Модель вузькозонного матеріалу з електронно-дірковою асиметрією / Л.Д. Дідух // Журн. фіз. досл. – 1997. – Т.1. – № 2. – С.241–250.